

磷、铋掺杂半导体锗光学性质的第一性原理研究

黄蕾 刘文亮 邓超生

First-principles study of optical properties of germanium doped with phosphorus and bismuth

Huang Lei Liu Wen-Liang Deng Chao-Sheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 136101 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20172680

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20172680>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I13>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

简并态锗在大注入下的自发辐射谱模拟

Simulation of spontaneous emission spectrum of degenerate Ge under large injection level

物理学报.2017, 66(15): 156102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.156102>

掺杂硅纳米梁谐振频率的理论模型及分子动力学模拟

Study on resonance frequency of doping silicon nano-beam by theoretical model and molecular dynamics simulation

物理学报.2017, 66(10): 106103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.106103>

Si基IV族异质结构发光器件的研究进展

Recent progress in Ge and GeSn light emission on Si

物理学报.2015, 64(20): 206102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.206102>

铒离子注入绝缘体上Si的射程分布研究

Investigation on range distribution of Er ions implanted in silicon-on-insulator

物理学报.2014, 63(17): 176101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.176101>

掺杂对多层Ge/Si(001)量子点光致发光的影响

Effect of doping on the photoluminescence of multilayer Ge quantum dots deposited on Si(001) substrate

物理学报.2013, 62(7): 076108 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.076108>

磷、铋掺杂半导体锗光学性质的第一性原理研究*

黄蕾 刘文亮[†] 邓超生

(湘潭大学物理与光电工程学院, 湘潭 411105)

(2017年12月18日收到; 2018年4月19日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论框架下的第一性原理计算, 研究了不同浓度N型掺杂锗的电子结构和光学性质. 掺杂元素分别为磷和铋, 并对掺杂后的电子态密度和光学性质进行计算、分析. 计算结果表明: N型掺杂会使得费米能级向导带方向移动. 在低能区段, 介电函数、折射率和吸收系数都受到影响, 但到高能区后只有消光系数和吸收系数会被影响; 反射率在整个能区都受影响, 在中能区掺杂会使反射率提高, 在低、高能区会减弱反射率; 对损失函数的影响是掺杂浓度越高、损耗峰越小、峰值出现处能量越高. 研究结果对N型掺杂半导体锗的光学应用具有一定的指导意义, 可以根据上述结论有针对性地调节掺杂浓度和能量范围.

关键词: 锗, N型掺杂, 光学性质**PACS:** 61.72.uf, 85.40.Ry, 74.25.Gz**DOI:** 10.7498/aps.67.20172680

1 引言

锗属于间接带隙材料, 是优良的半导体材料, 它可用于检波高频率电流和整流交流电, 也可用于红外光材料、精密仪器和催化剂. 锗的化合物可用于制造荧光板和各种折射率高的玻璃. 因此, 锗在许多方面具有潜在的应用价值^[1,2]. 但是间接带辐射复合过程需要声子的参与, 故其发光效率低于传统的 III, IV, V 族材料^[2-6]. 锗的直接带与间接带导带底之间在室温下仅相差 136 meV, 而直接带的辐射复合效率要比间接带的辐射复合效率高 3—5 个量级, 如果能实现锗的直接带隙发光, 它的直接带发光效率将和 III, IV, V 族材料相当^[4,7,8]. 其中的关键问题是如何使载流子更多地填充到锗的直接带能谷中. 通过应变和掺杂是解决这一关键问题的有效途径. 目前对锗材料的研究也主要集中在应变和掺杂上, 在理论和实验上取得了一定的进展^[9-13]. 虽然应变可以降低锗材料的直接带隙与

间接带隙差值, 但是当引入应变使锗成为直接带隙材料, 提高发光效率, 其对应的光波长变为 2.5 μm , 不满足实际的应用需要^[13,14].

电子结构(能带结构和电子态密度)是分析光电材料光电性能的重要依据. 掺杂能够改变晶体中原子的位置和晶胞的体积, 达到调制材料的电子结构并改变其光电性能的目的, 是改善光电材料的电性能及光学性质的重要方法. 因此通过掺入不同种类或不同含量的杂质来得到电子结构和光学性质更理想的光电子材料, 一直是各种光电子材料研究的热点. 对半导体材料的掺杂方式分为 P 型掺杂和 N 型掺杂两种. 在对锗的掺杂研究分析中, 由于 P 型掺杂所需掺杂的元素都是 III 族元素, 会使得掺杂后锗的金属性过强, 故而 N 型掺杂是解决如何填充更多的载流子到锗的直接带能谷中的一种较好的方法^[15-20]. 本文采用密度泛函理论的第一性原理方法研究掺杂不同浓度的磷和铋的半导体锗的光学性质, 得到不同掺杂元素和掺杂浓度对锗光学性质的影响机理.

* 国家自然科学基金(批准号: 11504311)和湖南省自然科学基金(批准号: 2017JJ3313, 2017JJ3308)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: wlliu@xtu.edu.cn

2 模型构建和计算方法

半导体锗属于金刚石型结构, 晶格常数 $a = b = c = 5.6575 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. 计算时采用的体系为 $2 \times 2 \times 1$, $3 \times 2 \times 1$ 和 $2 \times 2 \times 2$ 的超晶胞, 分别用掺杂原子替代上述 3 种超晶胞中的一个锗原子(如图 1 所示), 掺杂浓度分别为 1.563%, 2.083%, 3.125%.

本文采用基于密度泛函的第一性原理的赝势

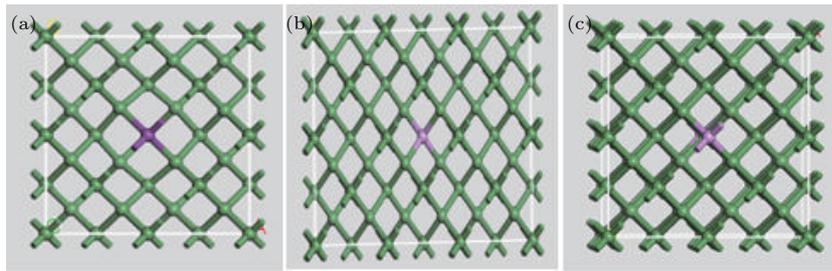


图 1 N型掺杂锗 $2 \times 2 \times 1$ (a), $3 \times 2 \times 1$ (b) 和 $2 \times 2 \times 2$ (c) 超晶胞结构

Fig. 1. $2 \times 2 \times 1$ (a), $3 \times 2 \times 1$ (b) and $2 \times 2 \times 2$ (c) supercell of N-type doped semiconductor germanium.

3 结果与讨论

3.1 电子态密度

3.1.1 未掺杂锗的电子态密度

为了便于比较掺杂后电子态密度的变化, 我们先计算未掺杂时锗的电子态密度. 图 2 为未掺杂时锗的总电子态密度和各分波电子态密度. 从图中可以看出, 价带部分态密度可以分为三个部分; 第一部分 ($-12 \sim -8.5 \text{ eV}$) 主要由 Ge-s 态密度(锗的

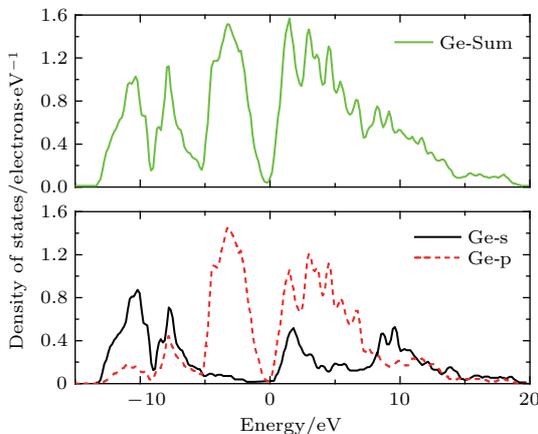


图 2 锗未掺杂时的电子态密度

Fig. 2. Electron density of states in germanium undoped.

平面波方法进行计算. 首先将掺杂后的体系进行几何结构优化, 得到体系的稳定结构. 在晶格参数和原子位置都优化的情况下, 再计算相应的电子能态密度和光学性质. 计算中采用广义梯度近似 Perdew-Burke-Ernzerhof 泛函来处理电子间的交换关联能^[7,8]; 为减少使用平面波基矢数目, 采用超软赝势^[8,9]处理离子实与电子间的相互作用; 再利用计算得到的光学性质模型进行光学性质的分析, 分别分析其反射率、吸收率、折射率、介电常数、电导率和损失函数, 得到这六种光学性质图.

s 态密度) 贡献; 第二部分 ($-8.5 \sim -4.5 \text{ eV}$) 由 Ge-s 态密度和 Ge-p 态密度(锗的 p 态密度) 共同贡献; 第三部分 ($-4.5 \sim 0 \text{ eV}$) 主要由 Ge-p 态密度贡献. 导带部分态密度在 $0 \sim 8 \text{ eV}$ 主要由 Ge-p 态密度贡献. 可以看出, 越靠近费米能级, Ge-p 态密度的贡献作用越重要.

3.1.2 掺杂磷后的电子态密度

图 3 是磷的掺杂浓度为 1.563%, 2.083% 和 3.125% 时, 各体系总的电子态密度和各分波态密度的曲线图. 对比图 2, 从图 3(a) — (c) 中总的电子态密度可以看出, 费米能级向导带方向移动. 同时, 在费米能级以下产生少量空穴能级, 掺杂浓度为 2.083% 时最为明显; 掺杂浓度为 1.563% 和 3.125% 时, 在 -8 eV 处会产生少量空穴能级. 掺杂磷后, 主要在 -13.5 eV , -5 eV 和 1.5 eV 处对总的电子态密度产生影响. 图 3 中 3 幅图相互对比可以看出: 总电子态密度和各分波态密度, (a) 和 (c) 的曲线极为相似, 故而磷掺杂浓度为 1.563% 和 3.125% 时, 对体系造成的影响几乎一样. 掺杂使得能态密度能量变大; 价带顶和导带底主要由 Ge-p 态密度决定. 随着掺杂浓度的增加, 导带底向高能方向移动, 而价带顶随着掺杂浓度的变化, 先向低能方向移动, 后向高能方向移动.

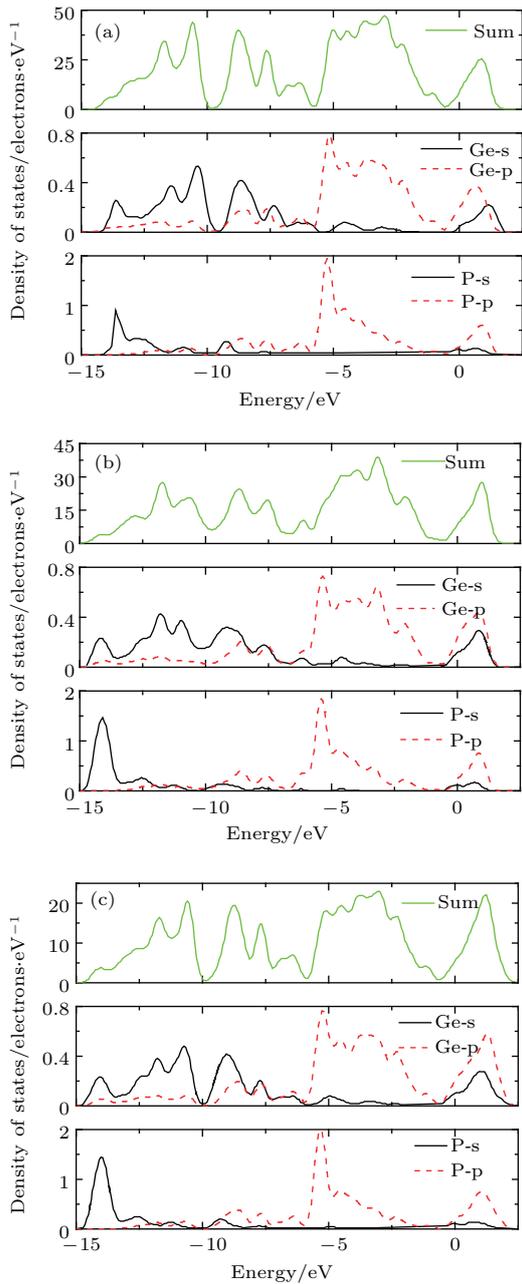


图3 磷掺杂浓度为1.563% (a), 2.083% (b), 3.125% (c) 的锗电子态密度

Fig. 3. Electron density of states in phosphorus-doped germanium with impurity concentration of 1.563% (a), 2.083% (b) and 3.125% (c).

3.1.3 掺杂铋后的电子态密度

图4为铋的掺杂浓度为1.563%, 2.083%和3.125%时, 各体系总的电子态密度和各分波态密度的曲线图。对比图2我们可以知道, 费米能级向导带方向移动; 对比图3后可以知道, 在-24—-23 eV处有着电子态分布, 通过分析各原子的分波电子态密度可知该处电子态密度由Bi-d态密度(铋的d态密度)贡献。掺杂铋后, 除了Bi-d态密度

在-24—-23 eV和Bi-s态密度在-14—-13 eV处对总电子态密度产生影响外, 未对总电子态密度产生影响。

图4中3幅图对比可以发现, 掺杂浓度为1.563%和3.125%时对态密度影响大致相同。随着掺杂浓度的增加, 锗的导带能态密度会随之增加; 导带底向高能方向移动, 而价带顶随着掺杂浓度的变化, 先向低能方向移动, 后向高能方向移动。

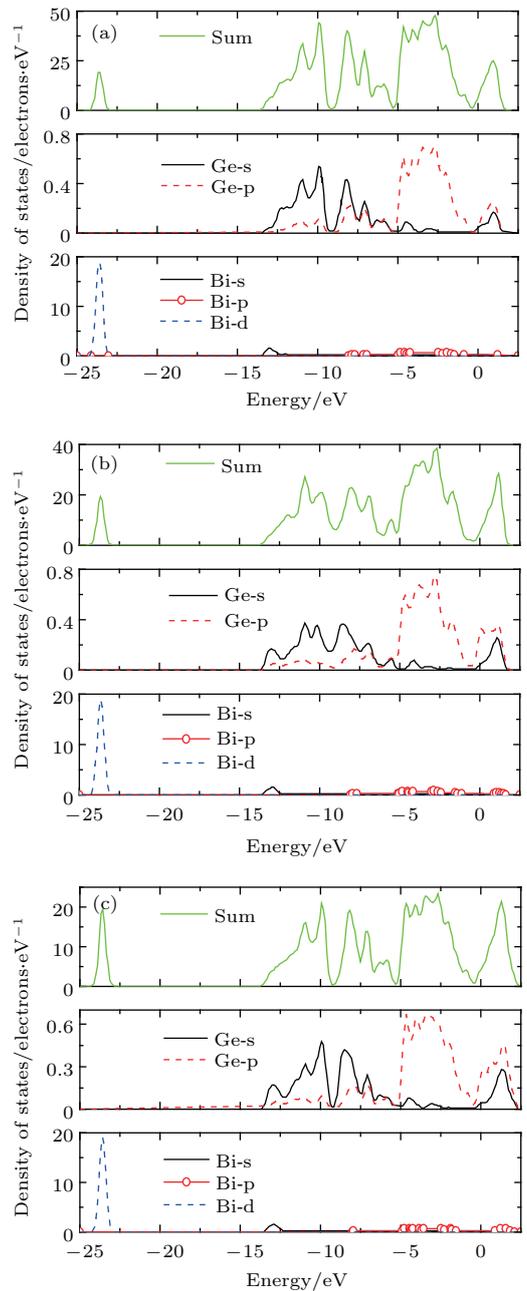


图4 铋掺杂浓度分别为1.563% (a), 2.083% (b), 3.125% (c) 的电子态密度

Fig. 4. Electron density of states in bismuth-doped germanium with impurity concentration of 1.563% (a), 2.083% (b) and 3.125% (c).

N型掺杂改变了体系中各原子的相对位置和晶胞的体积大小,同时改变了体系载流电子数目.在准平衡状态下,锗直接带与间接带能谷的差值决定了直接带能谷占有电子数的多少.这个差值越小,则直接带能谷占有的电子数将越多.根据泡利不相容原理,当在半导体中掺杂增加时其带隙会发生改变,价带顶和导带中未占据能态发生分离.由此,可以通过改变掺杂浓度来实现直接带能谷电子数目的改变,从而来改善锗的光学性质.

3.2 光学性质

要研究半导体锗的光学跃迁特性,必须对它的光学性质进行研究.在线性响应范围内,固体宏观光学响应函数通常可以由光的介电函数 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 来描述,式中 $\epsilon_1(\omega)$ 为介电函数实部, $\epsilon_2(\omega)$ 为介电函数虚部.而晶体中声子和电子间的相互作用可以用电子基态波函数中包含的含时微扰项来表示,声子电场扰动引起了电子波函数在占据态与非占据态间的转变,所以激子对光谱

产生的结果与价带和导带的状态密度之间的关系便可以通过选择合适的加权性矩阵元素来实现.根据直接跃迁概率的定义和克拉默斯-克勒尼希色散关系可以推导出晶体的 $\epsilon_1(\omega)$,同时可以利用计算占据态和非占据态波函数的矩阵元素得到 $\epsilon_2(\omega)$,

$$\epsilon_2 = \frac{4\pi^2}{(m\omega)^2} \sum_{V,C} \int_{BZ} d^3K \frac{2}{2\pi} |e \cdot M_{CV}(\mathbf{K})|^2 \times \delta[E_C(\mathbf{K}) - E_V(\mathbf{K}) - E_\omega],$$

式中 C, V 分别表示导带和价带; BZ 为第一布里渊区; \mathbf{K} 为倒格矢, $E = \hbar = h/2\pi$; $|e \cdot M_{CV}(\mathbf{K})|^2$ 为动量跃迁矩阵元; ω 为角频率; $E_C(\mathbf{K})$, $E_V(\mathbf{K})$ 分别为导带和价带上的本征能级.其他的光学性质可以由 $\epsilon_1(\omega)$ 和 $\epsilon_2(\omega)$ 推导出,如反射率 $R(\omega)$, 吸收率 $I(\omega)$ 等.从某种意义上说, $\epsilon(\omega)$ 比宏观光学常数更能表征材料的物理特性,更易于与物理过程的微观模型及固体的微观电子结构联系起来.由于锗半导体主要工作在可见光和红外光区,因此将主要研究改善锗在低能区段的光学性质.

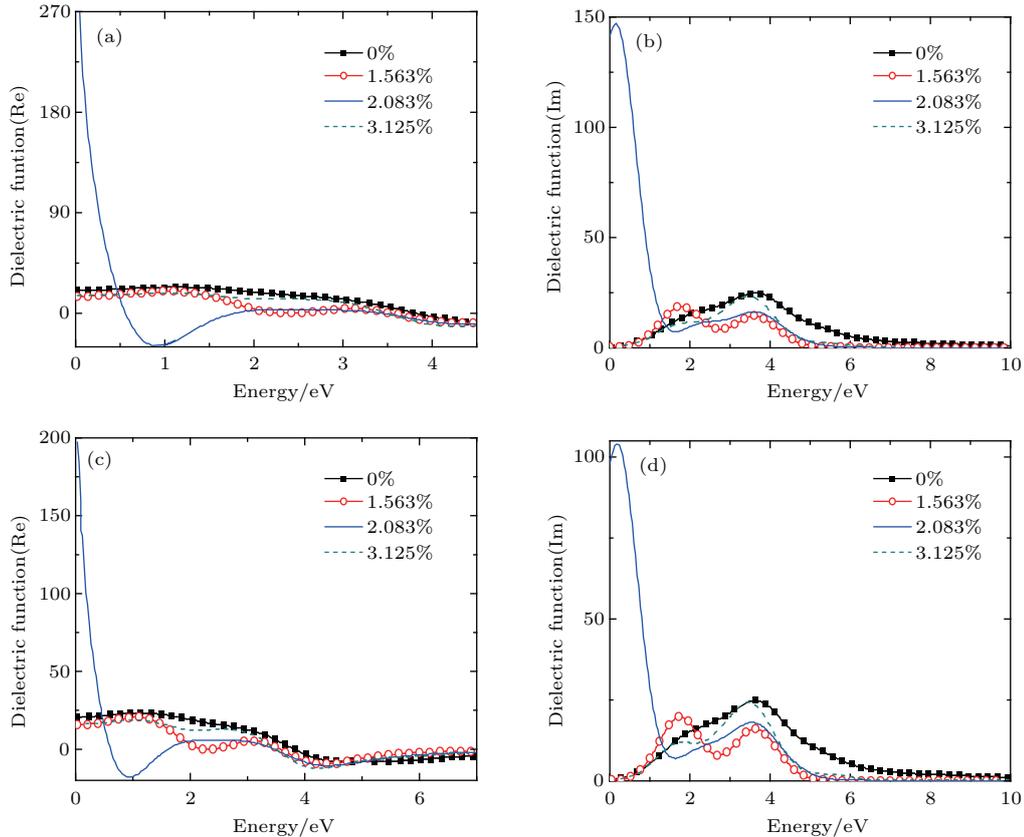


图5 锗掺杂磷后介电函数的实部(a)、虚部(b)和掺杂铋后的实部(c)、虚部(d)

Fig. 5. Real part and imaginary part of dielectric function of phosphorus-doped (a) and (b) and bismuth-doped (c) and (d) germanium.

3.2.1 介电函数分析

介电函数虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 对任何材料来说都是非常重要的, 它作为沟通带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁, 反映了固体能带结构及其他各种光谱信息. 图 5 为计算得到的介电函数的实部和虚部.

从图 5 可以看出, 当掺杂浓度为 2.083% 时, 低能区段的介电函数相对于未掺杂和另外两种掺杂浓度时都有很大变化. 比较图 5(a) 和图 5(c), 当掺杂浓度相同时, 掺杂磷和铋对介电函数的实部的影响趋势大致相同. 分析图 5(a) 可知, 未掺杂时的静态介电函数 $\epsilon_1(0) = 20$. 掺杂磷后, 随着掺杂浓度的增加, $\epsilon_1(0)$ 的值分别 15, 270, 15. 掺杂后的 ϵ_1 一般会比未掺杂的小, 但是掺杂浓度为 2.083% 的 ϵ_1 在 $E < 0.5$ eV 时会比未掺杂的大. 在 $2 < E < 3$ eV 的能量范围时, ϵ_1 随掺杂浓度的增大而增大. 当 $E > 4.5$ eV 时, 掺杂后的 ϵ_1 逐渐接近未掺杂的值. 分析图 5(c) 可知, 未掺杂时的静态介电函数 $\epsilon_1(0) = 20$. 掺杂铋后, 随着掺杂浓度的增加, $\epsilon_1(0)$ 的值分别 15, 200, 15. 掺杂后的 ϵ_1

在 $E < 4.4$ eV 时, 一般会比未掺杂的小, 但是掺杂浓度为 2.083% 的 ϵ_1 在 $E < 0.5$ eV 时会比未掺杂的大.

由图 5(b) 和图 5(d) 可知, 掺杂将一个介电峰变成了两个介电峰. 第一介电峰的位置随着掺杂浓度的增加, 先向低能方向移动后向高能方向移动; 且第一介电峰的峰值也是随着掺杂浓度的增加而先增大后减小. 第二介电峰的位置和未掺杂时的峰值位置大致相同; 未掺杂的峰值要大于掺杂后的峰值, 且随着掺杂浓度的增加, 第二介电峰的峰值随之增加. 在 $E < 1$ eV 的范围时, 掺杂浓度为 2.083% 的光跃迁强度远大于未掺杂的锗, 且掺杂磷的光跃迁强度要大于掺杂铋的光跃迁强度. 其余两个掺杂浓度对 ϵ_2 的改变相对来说不是很大. 说明掺杂能够增强电子在 $E < 1$ eV 低能端的光学跃迁, 且磷掺杂的效果要好于铋掺杂的效果.

3.2.2 折射率分析

图 6 为折射率 n 和消光系数 k . 由图 6(a) 和图 6(b) 可知, 未掺杂锗的折射率 $n_0 = 1.5$, 与实验

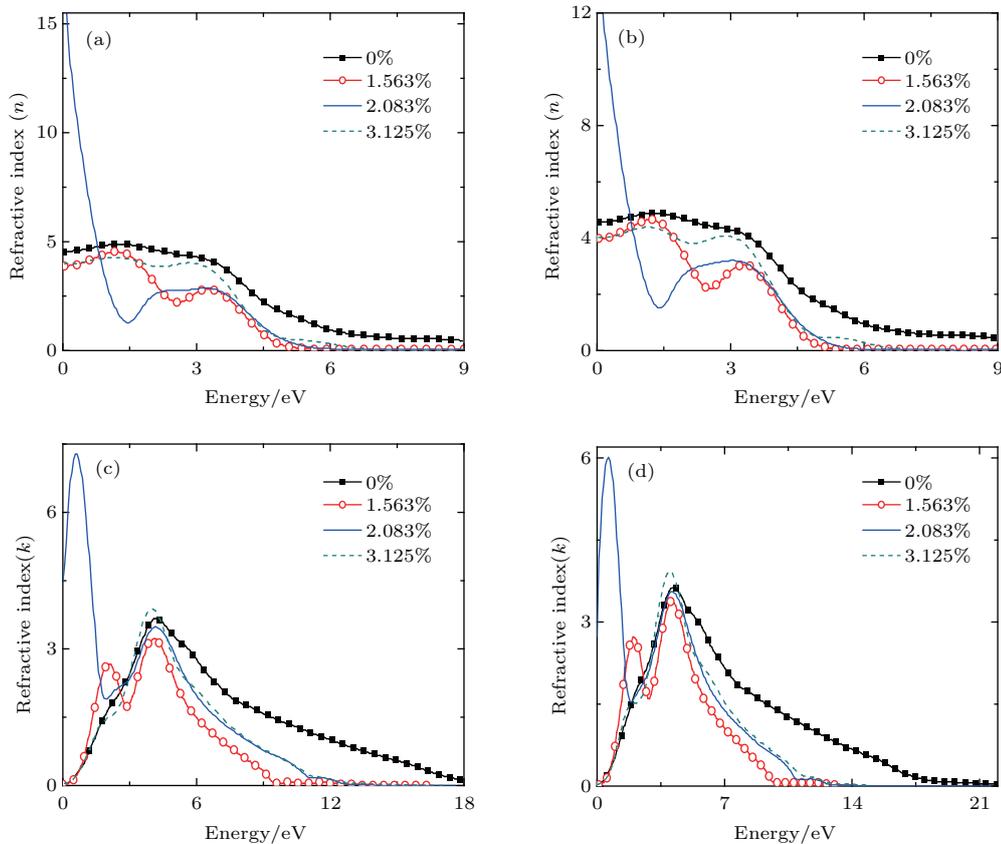


图 6 锗掺杂磷后的折射率 (a)、消光系数 (c) 和掺杂铋后的折射率 (b)、消光系数 (d)

Fig. 6. Refractive index and extinction coefficient of phosphorus-doped (a) and (c) and bismuth-doped (b) and (d) germanium.

测得的数据接近,同时该结果也与图4中静态介电函数 $\epsilon_1(0) = 20$ 的计算结果完全相对应. 掺杂磷或铋对折射率的影响趋势是一致的,掺杂使得折射率相对于未掺杂时会有所减小. 但是当 $E < 1$ eV,掺杂浓度为2.083%时,折射率要大于未掺杂时的值,这种低能区的高折射率有利于促进锗荧光板和高折射率玻璃在红外光区以及可见光区的研究和应用. 掺杂后,折射率 n 在 $4 < E < 5$ eV范围时的减小趋势相对于未掺杂的减小趋势更加明显;且当 $E > 7$ eV后,折射率趋于零. 这与反射图(图8)中该能量范围的反射率趋近于1是对应的,表明锗在这一能量范围呈现出金属反射特性.

由图6(c)和图6(d)可知,掺杂后,当掺杂浓度相同时,掺杂的元素对消光系数的影响大致一样;消光系数在 $E = 4$ eV处取得最大值,在4—12 eV范围内,随能量的增加 k 逐渐减小,且掺杂后的消光系数减小速度要快于未掺杂时的情况,在 $E > 12.5$ eV的范围内消光系数 k 为零. 当 $E > 4$ eV后,相同能量时,掺杂浓度越大消光系数越大.

3.2.3 吸收系数分析

根据吸收系数和介电函数的关系 $\alpha(\omega) = \frac{\omega}{nc} \epsilon_2(\omega)$,可以得到吸收系数 $\alpha(\omega)$,计算结果如图7所示. 从图7可以看出,未掺杂时的锗在 $E < 0.4$ eV和 $E > 23$ eV的能量范围,吸收系数为零. $E > 0.4$ eV后吸收系数随光子能量的增大逐渐增大. 在入射光子能量 $E = 5.5$ eV处,吸收系数取得最大值 $2.7 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$. 随后吸收系数随光子能量的增大逐渐减小,在 $E = 23$ eV处减小到零.

掺杂后,当掺杂浓度相同时,掺杂元素的不同对吸收系数的影响趋势相同. 在能量小于2.5 eV范围时,掺杂浓度为1.563%和2.083%的吸收系数大于未掺杂的吸收系数;在 $3 < E < 4$ eV范围内,掺杂与否对吸收系数几乎无影响;在 $E = 4$ eV附近,吸收系数 α 取得最大值,最大值随掺杂浓度的增加而增加,且当掺杂浓度相同时,掺杂铋的吸收系数要略大于掺杂磷的吸收系数;在 $E > 4$ eV后 α 随能量的增大而减小,在 $E = 15$ eV附近减小到零.

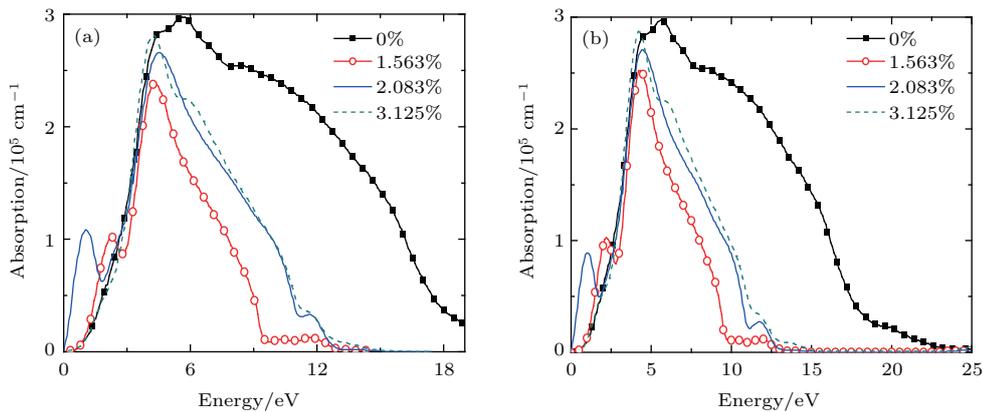


图7 锗掺杂磷后的吸收系数(a)和掺杂铋后的吸收系数(b)

Fig. 7. Absorption coefficient of phosphorus-doped (a) and bismuth-doped (b) germanium.

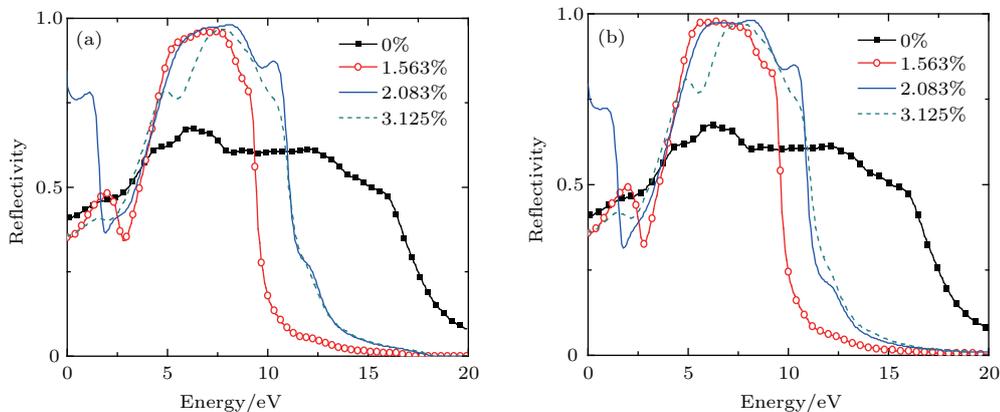


图8 锗掺杂磷后的反射率(a)和掺杂铋后的反射率(b)

Fig. 8. Reflectivity of phosphorus-doped (a) and bismuth-doped (b) germanium.

3.2.4 反射率分析

根据反射率与折射率的关系 $R(\omega) = (n-1)^2 + k^2 / (n+1)^2 + k^2$ 可以计算得到反射率.

从图8中可以看出, 半导体锗未掺杂时的反射主要发生在能量为4—13 eV的区域, 反射率为60%左右. 掺杂后, 当掺杂浓度相同时, 掺杂元素的不同对反射率的影响趋势相同. 半导体锗掺杂后反射主要发生在5—9 eV区域, 反射率大于90%, 平均反射效率增大. 这是由于在这一能量范围内锗呈现出金属反射特性, 入射的光大部分被反射了, 对应折射率的值趋于零; 在能量大于12 eV后, 掺杂后平均反射效率减小, 金属反射特性逐渐下降, 而对光的折射特性增强, 这对光电子材料的应用是有利的.

3.2.5 光电导率分析

光电导率是光电子材料的一个重要参数, 它描述了光照引起半导体电导率改变的现象. 图9为

掺杂前后半导体锗的光电导率实部 $\sigma_1(\omega)$ 和虚部 $\sigma_2(\omega)$. 从图9(a)和图9(c)可知, 光电导率与介电函数的虚部是对应的. 未掺杂时, $\sigma_1(\omega)$ 在 $E < 3.9$ eV的范围内随能量的增加而增加, 在 $E = 3.9$ eV时达到最大峰值. 掺杂后, 掺杂浓度相同时, 对光电导率实部的影响趋势一致, 但是掺杂磷后的光电导率第一峰值要大于掺杂铋后的情况, 而掺杂铋后的光电导率第二峰值要大于掺杂磷后的情况. 掺杂浓度为2.083%时最先产生第一峰值; 掺杂第二峰值随掺杂浓度的增加而增加, 峰值出现的位置随掺杂量的增加而向低能方向偏移. 从图9(b)和图9(d)中可以看出, 掺杂后, 掺杂浓度相同时, 对光电导率虚部的影响趋势一致, 但当掺杂浓度为2.083%时, 掺杂磷后的第一峰值要明显大于掺杂铋后的情况. 掺杂使第二峰值出现位置向低能方向移动, 第二峰值大小随掺杂浓度的增加而增加.

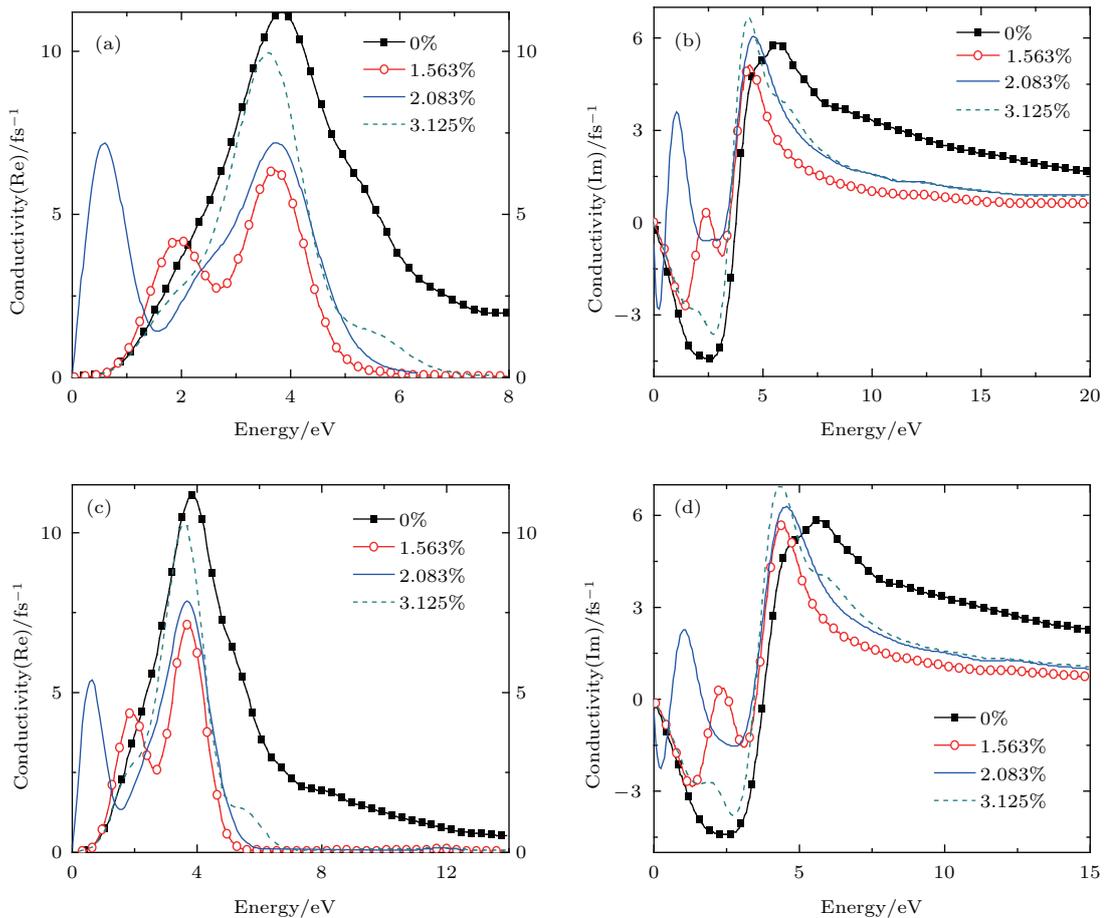


图9 锗掺杂磷后光电导率的实部 (a)、虚部 (b) 和掺杂铋后的光电导率实部 (c)、虚部 (d)

Fig. 9. Real part and imaginary part of photo conductivity of phosphorus-doped (a) and (b) and bismuth-doped (c) and (d) germanium.

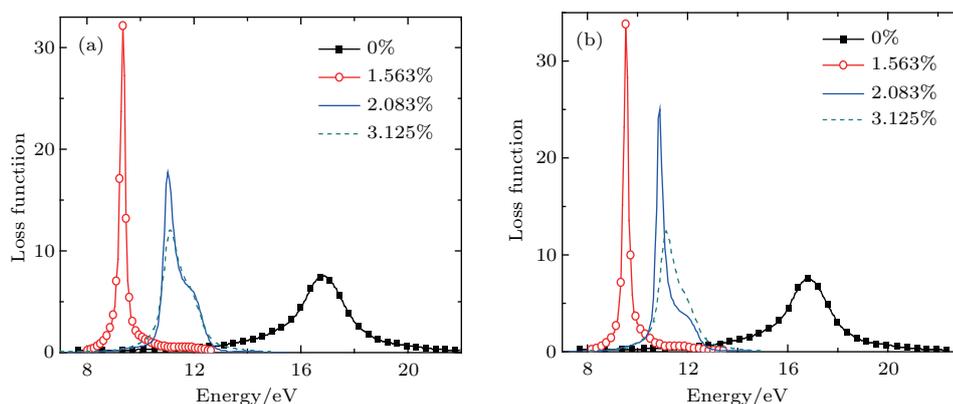


图10 掺杂磷后能量损失函数 (a) 和掺杂铋后的能量损失函数 (b)

Fig. 10. Energy-loss function of phosphorus-doped (a) and bismuth-doped (b) germanium.

3.2.6 能量损失函数分析

能量损失函数用于描述电子通过均匀的电介质时能量损失的情况, 其峰值代表与等离子体振荡相关联的特性, 相应的振荡频率称为等离子体频率. 图10为掺杂前后的能量损失函数. 由图可知, 随着掺杂浓度的增大, 半导体锗掺杂后的能量损失函数峰值逐渐向低能区移动, 且损失函数峰值远大于未掺杂时的能量损失函数峰值. 能量损失函数峰值产生位置随掺杂浓度的增加而向高能方向移动. 在相同掺杂浓度时, 掺杂铋后的能量损失函数峰值要略大于掺杂磷的能量损失函数峰值.

3.3 小结

通过对锗半导体进行不同浓度的N型掺杂, 其光学性质都发生了变化. 特别是掺杂浓度为2.083%时, 介电函数、折射率、消光系数、反射率和光电导率这些光学性质在低能区的变化明显有别于其他两种掺杂浓度, 为锗半导体在低能区段的研究、应用提供了更多的方向和理论依据. 能量损失函数峰值因掺杂而增加, 并向低能区移动; 掺杂浓度越低, 向低能区的移动越明显(可在掺杂浓度为0—1.563%的区段找出向低能区移动最多的掺杂浓度); 峰值大小和产生峰值时的能量随着掺杂浓度的增加而减小.

4 结论

采用基于密度泛函理论的第一性原理赝势平面波方法, 对不同掺杂元素和不同掺杂浓度的电子结构、介电函数、折射率、吸收率、反射率和光电导

率等光学性质进行了全面的计算和分析. 掺杂使得费米面向导带偏移, 在费米能级附近, 占主导地位的Ge-p态构成的价带和导带均向高能方向移动, 价带顶和导带底也随之向高能方向移动, 带隙值出现先减小后增大的变化. 掺杂浓度为2.083%时对介电函数、折射率和消光系数在低能区的影响与其余两个掺杂浓度在低能区的影响有很大区别; 不同的掺杂浓度对吸收系数的影响一致, 相比于未掺杂时对吸收系数的影响主要在低能区和高能区; 掺杂对反射率的影响大致相同, 主要是在中能区提高了反射效率, 在低能区和高能区却是减小反射效率, 但是在低能区掺杂浓度为2.083%时有效地增加了折射率; 掺杂对光电导率的影响在低能区; 掺杂对损失函数的影响是掺杂浓度越高、损耗峰越小、峰值出现处能量越高. 本文计算分析了掺杂浓度和掺杂元素对半导体锗各种光学性质的影响, 为锗在光学上的实际应用提供了理论参考.

参考文献

- [1] Sharafi Z, Mohyeddine S, Mohammed S O, Kershi R M, Ravindra R P 2014 *Phys. Res. Int.* **10** 1155
- [2] Li Y P, Li C X, Zhuo X, Liu Z T 2016 *J. Alloys Compd.* **10** 1016
- [3] Jordan W B, Wagner S 2002 *MRS Proc.* **10** 1557
- [4] Pan F C, Lin X L, Chen H M 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 224218 (in Chinese) [潘凤春, 林雪玲, 陈焕铭 2015 物理学报 **64** 224218]
- [5] Ray S, Samaresh D, Singha R, Manna S, Achintya D 2011 *Nanoscale Res. Lett.* **02** 224
- [6] Alireza S Z, Othaman S K, Ghoshal M, Mustafa K 2015 *Chin. Phys. B* **25** 028103
- [7] Donat J A, Michael D, Gerlach J, Dirk R 2016 *MRS Adv.* **10** 1557

- [8] Burbaev T M, Zavaritskaya T N, Kurbatov V A, Mel'nik N N, Tsvetkov V A, Zhuravlev K S, Markov V A, Nikiforov A I 2001 *Semicond. Sci. Technol.* **10** 1134
- [9] Duan M Y, Xu M, Zhou H P, Chen Q Y, Hu Z G, Dong C J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6520 (in Chinese) [段满益, 徐明, 周海平, 陈青云, 胡志刚, 董成军 2008 物理学报 **57** 6520]
- [10] Palumbo M, Onida G, Del Sole R, Stella A, Tognini P, Cheyssac P, Kofman R 2001 *Phys. Stat. Sol.* **10** 1002
- [11] Chen X H 2013 *Ph. D. Dissertation* (Xiamen: Xiamen University) (in Chinese) [陈小红 2013 博士学位论文(厦门: 厦门大学)]
- [12] Cheng S L, Lu J, Shambat G, Yu H Y, Saraswat K, Vuckovic J, Nishi Y 2009 *Opt. Express* **17** 10019
- [13] Hou Q Y, Dong H Y, Ying C, Ma W 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 167102 (in Chinese) [侯清玉, 董红英, 迎春, 马文 2012 物理学报 **61** 167102]
- [14] Shen X J 2013 *Ph. D. Dissertation* (Suzhou: Suzhou University) (in Chinese) [申小娟 2013 博士学位论文(苏州: 苏州大学)]
- [15] Sun X C, Liu J F, Kimerling L C, Michel J 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 1103
- [16] Li M, Li J C 2006 *Mater. Lett.* **10** 1025
- [17] Shea H R, Martel R, Avouris P 2000 *Phys. Rev. Lett.* **03** 1152
- [18] Hu C Q, Tian Y, Wang J B, Sam Z, Cheng D Y, Chen Y, Zhang K, Zheng W T 2016 *Vacuum* **10** 1016
- [19] Shen Y, Mueller G, Watanabe S, Gardner N, Munkholm A, Krames M 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 141101
- [20] Huang S H, Li C, Chen C Z, Zheng Y Y, Lai H K, Chen S Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 036202 (in Chinese) [黄诗浩, 李成, 陈城钊, 郑元宇, 赖虹凯, 陈松岩 2012 物理学报 **61** 036202]

First-principles study of optical properties of germanium doped with phosphorus and bismuth*

Huang Lei Liu Wen-Liang[†] Deng Chao-Sheng

(School of Physics and Optoelectronics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

(Received 18 December 2017; revised manuscript received 19 April 2018)

Abstract

Using first-principles calculations based on density functional theory, we investigate the electronic structures and optical properties of germanium doped by phosphorus and bismuth with different concentrations. By analyzing the electronic structures and optical properties of the doped systems, we can theoretically analyze and predict the optical and electrical practical applications of N-doped germanium semiconductors. By analyzing and comparing the densities of electronic states before and after doped, we can draw some conclusions. The conclusions show that the Fermi level moves in the direction of conduction band after being doped. Although germanium is an indirect band gap luminescent material, the doped systems all become direct band gap luminescence. Doping more or less affects various optical properties in different energy ranges. In a low energy range, the dielectric function and refractive index of the doped systems are affected. When the doping concentration is 2.083%, the dielectric function and refractive index of the doped system both have a special change. And the absorption of the doped system is changed in the high energy. As the energy increases after the absorption peak, the absorption of the doped system drops faster. The reflectance of the doped system is affected in all the energy ranges. The reflectance of the doped system increases in medium energy. And the reflectance of the doped system is reduced in low energy and high energy range. However, when the doping concentration is 2.083% and the energy is less than 1.7 eV, the reflectance of the doped system is higher than that of the undoped system. The conductivity of the doped system forms two peaks, adding a peak in low energy. The additional peaks in the systems where the doping concentrations are 1.563% and 2.083% are obvious. The peak of the loss function increases after being doped. However, as the doping concentration increases, the increment of the loss function decreases. As the doping concentration increases, the peak is formed at a higher energy. The conclusions are of significance for guiding the optical applications of N-type doped germanium. According to the conclusions, we can adjust the doping concentration and energy range in the optical applications of N-doped germanium.

Keywords: germanium, N-type doping, optical properties

PACS: 61.72.uf, 85.40.Ry, 74.25.Gz

DOI: 10.7498/aps.67.20172680

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11504311) and Hunan Natural Science Foundation, China (Grant Nos. 2017JJ3313, 2017JJ3308).

[†] Corresponding author. E-mail: wlliu@xtu.edu.cn